PIEZO-FLEXO-ELECTRICIDAD Y CONFINAMIENTO CUANTICO: MODELADO Y FORMULACION DEL PROBLEMA DE CONDICIONES INICIALES Y DE BORDE

PIEZO-FLEXO-ELECTRICITY AND QUANTUM CONFINEMENT: MODELING AND FORMULATION OF THE INITIAL / BOUNDARY CONDITIONS PROBLEM

Juan Carlos Barreto[a], Javier Luis Mroginski[b] y Mario Alejandro Meza[a]

[a] *Laboratorio de Modelización y Simulación Numérica, Universidad Nacional de Formosa, Av. Gutnisky 3200 Formosa, http://www.unf.edu.ar*

[b] *Laboratorio de Mecánica Computacional, Universidad Nacional del Nordeste LAMEC - IMIT (CONICET), Av. Las Heras 727, 3500 Resistencia, Chaco, Argentina*

Palabras clave: Flexo-electro-elasticidad, polarización dieléctrica, puntos cuánticos, potencial de confinamiento

Resumen. La piezo-flexo-electricidad, es una propiedad que poseen los materiales aislantes (dieléctricos centro-simétricos), los cuales se polarizan cuando se los somete a un gradiente de deformación, y a un campo eléctrico simultáneamente, en la nano-escala. Desde esta perspectiva, y de manera análoga, respecto del caso micromecánico, podemos suponer que aparecerá una fuerza configuracional, que producirá una deformación residual, denominada piezo-flexo-eléctrica, idéntica a la que aparece en el experimento de Eshelby clásico, y que tendrá un efecto de confinamiento, este hecho ocurre físicamente, dando lugar a la aparición de una fluctuación mecano-cuántica (confinamiento cuántico), cero, uni, bi, o tridimensional, en el primer caso hablamos de puntos cuánticos. En el presente trabajo se formulan las ecuaciones constitutivas de la piezo-flexo-electricidad, sus ecuaciones de movimiento, se especifican las condiciones de resolubilidad del sistema piezo-flexo-eléctrico.

Keywords: Piezo-flexo-electricity, dielectric polarization, quantum dots, confinement potential.

Abstract. Piezo-flexo-electricity is a property of insulating materials (centro-symmetrical dielectrics), which polarize when subjected to a strain gradient and an electric field simultaneously at the nanoscale. From this perspective, and analogously, with respect to the micromechanical case, we can assume that a configurational force will appear, which will produce a residual deformation, called piezo-flexo-electric, identical to the one that appears in the classical Eshelby experiment, and that it will have a confinement effect, this fact occurs physically, giving rise to the appearance of a mechano-quantum fluctuation (quantum confinement). zero, uni, bi, or three-dimensional, in the first case we talk about quantum dots. In the present work, the constitutive equations of the piezo-flexo-electricity, its equations of motion, and the resolubility conditions of the piezo-flexo-electric system are specified.

1. INTRODUCCIÓN

1.1. Definiciones preliminares y algunas dificultades teórico-experimentales

La flexo-electricidad está fuertemente relacionada con la piezo-electricidad, pero, mientras que la piezo-electricidad se refiere a la polarización debida a una deformación uniforme, la flexo-electricidad se refiere específicamente a la polarización debida a una deformación que cambia de un punto a otro en el material.

Debido a que, el gradiente de deformación rompe la simetría de inversión, la flexo-electricidad permite la generación de polarización eléctrica a partir de deformaciones de la red en materiales dieléctricos.

Matemáticamente, el efecto flexo-eléctrico está controlado por un tensor de cuarto orden y, por lo tanto, aparece en materiales de cualquier simetría, mientras que la piezoelectricidad está asociada a un tensor de tercer orden, que solo está permitido en materiales que no son centro-simétricos.

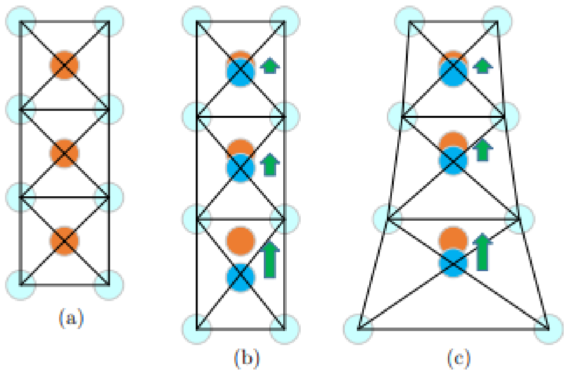


Figura 1: Origen del efecto flexo-eléctrico en sólidos. Huang et al. (2018)

(a) Estructura bidimensional (2D) de cargas elementales sin momento dipolar. (b) Bajo una tensión de tracción uniforme para cada celda unitaria, la tensión varía gradualmente de una celda a otra. (c) Bajo deformación no homogénea, se indujo un momento dipolar a través del efecto flexo-eléctrico dentro de la celda unitaria

Este hecho podría permitir la introducción de mecanismos análogos a los de ruptura espontanea de la simetría (Spontaneous Symmetry Breaking, SSB) utilizados frecuentemente en la teoría cuántica de campos (Quantum Field Theory) y también la posibilidad del uso de laplacianos generalizados del tipo Laplace Beltrami, para tratar problemas sobre superficies, o de tipo Dunkl

$$\Delta u_j(x,t) = \frac{1}{\sqrt{|\boldsymbol{g}|}}\left\{\sqrt{|\boldsymbol{g}|}\,\boldsymbol{g}^{nk}u_{j,n}(x,t)\right\}_{,k} \; ; \; g^{ij} \text{ – Tensor métrico asociado a la variedad} \qquad (1)$$

$$\Delta_k u_j(\vec{x},t) = \nabla^2 u_j(\vec{x},t) + \sum_{\alpha\in R}^{s} k(\alpha)\frac{\langle \nabla u_j, \alpha\rangle}{\langle \vec{x}, \alpha\rangle} - \frac{|\alpha|^2}{2}\frac{\{u_j(x) - u_j(\sigma_\alpha(\vec{x}))\}}{\langle \vec{x}, \alpha\rangle} \qquad (2)$$

El laplaciano de Dunkl es la suma de un operador diferencial de segundo orden y un término de diferencia asociado a una función de multiplicidad k y un grupo de reflexión W. Una motivación importante para estudiar el laplaciano de Dunkl surge de su relevancia para el análisis de ciertos modelos de mecánica del continuo, que se definen como exactamente resolubles, a saber, el modelo de tipo Calogero-Moser-Sutherland.

A diferencia de la piezoelectricidad, que existe sólo en 20 grupos de puntos de sistemas sin centro-simetría, la flexo-electricidad ocurre en los 32 grupos de puntos cristalinos. Esta naturaleza universal ha inspirado un gran interés científico debido a las posibles aplicaciones de la flexo-electricidad.

Así entonces ambos fenómenos, en rigor, aparecen en distintas escalas y asociados a mecanismos diferentes, lo interesantes radica en el hecho de que, mientras en la meso-escala, la flexo-electricidad es inexistente, o por lo menos muy difícil de detectar, a escala nanoscópica se manifiesta como la principal interacción de tipo electromecánica, sin embargo, a esta escala, en ciertos materiales centro-simétricos también aparece la piezo-electricidad, esto es aproximadamente a 3 o 4 nm, coexisten ambos fenómenos sin superponerse fuertemente.

Se impone, en este punto realizar algunas consideraciones de carácter teórico, a efectos de mostrar algunas complejidades, en el abordaje del problema

a) Se asume que, la mecánica de medios continuos en la formulación de segundo gradiente, o superiores, según las prescripciones del formalismo de Mindlin-Aifantis, es la más adecuada, para la descripción de este tipo de fenómenos.

b) El mecanismo clásico consistente en la introducción de micro o nano-estructuras, a partir de las cuales se podría argumentar la presencia de flexo-electricidad, se ve limitada, dado que el mecanismo de Eshelby, o de Eshelby-Mura, se transforma en mecanismo de confinamiento, de carácter eminentemente cuántico, en relación con la aparición de puntos cuánticos, se detectan en cambio, cuasi partículas llamadas polarones, o estados todavía más complejos, como los de tipo exiton-polaron los cuales generan polaritones, así entonces el acoplamiento entre gradientes de deformación y polarización clásica, tiene ciertas limitaciones de tipo operatorial, es decir el funcional de energia que podamos elegir o proponer no es único y además las constantes de acoplamiento aún no han sido medidas con precisión

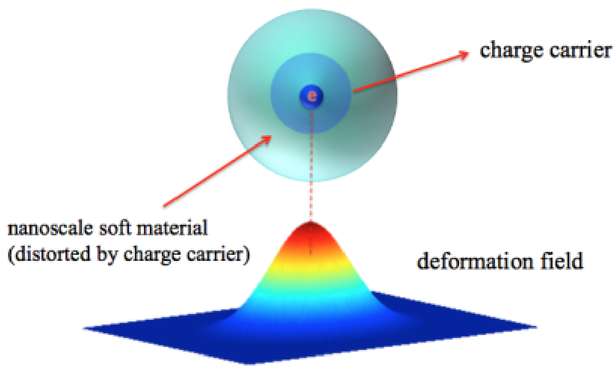


Figura 2: Li (2015)

La Figura 2, muestra la inyección de un portador de carga en un dieléctrico, generado por flexo-electricidad, a 2 nm, quedando confinado en un lugar determinado. El portador de carga, junto con la deformación circundante localizada, forma la cuasi-partícula llamada polarón. El campo de deformación depende de la fuerza del acoplamiento electrón-fonón. Una vez que se forma un polarón, cualquier estímulo que perturbe el campo cuántico (función de onda) alterará el campo de deformación, causando así una deformación mecánica adicional

c) En la formulación de Bernoulli-Euler o de Timoshenko para nano-vigas en 2D, el cálculo del efecto de flexión por una cierta distribución del vector campo de polarización nos obliga a admitir la consideración de un tensor de cuarto orden denominado tensor de efecto directo, e inmediatamente el efecto inverso, es decir, la generación de un campo de polarización por influencia de un campo de gradientes de deformación

d) Suponiendo la validez de una teoría lineal extendida para dieléctricos, que incorpora términos que involucran los gradientes de deformación elástico, del campo eléctrico, y una función de onda asociada a una ecuación de Schrödinger, tendremos la expresión más general para la función de densidad de energía libre de Gibbs, U_b la cual puede escribirse como sigue: (Hu y Shen, 2009)

$$\begin{aligned} U_b = &-(1/2)\boldsymbol{E}_k \cdot \boldsymbol{a}_{kl} \cdot \boldsymbol{E}_k - (1/2)\boldsymbol{E}_{i,j} : \boldsymbol{b}_{ijkl} : \boldsymbol{E}_{k,l} + (1/2)\boldsymbol{\varepsilon}_{ij} : \boldsymbol{C}^e_{ijkl} : \boldsymbol{\varepsilon}_{kl} - \\ &- \boldsymbol{\varepsilon}_{ij} : \boldsymbol{e}_{ijkl} : \boldsymbol{E}_{k,l} - \boldsymbol{\varepsilon}_{ij} : \boldsymbol{d}_{ijk} \cdot \boldsymbol{E}_k - \boldsymbol{E}_i \cdot \boldsymbol{h}_{ijk} : \boldsymbol{E}_{j,k} - \boldsymbol{E}_i : \boldsymbol{f}_{ijkl} \therefore u_{j,kl} + \\ &+ \boldsymbol{\varepsilon}_{ij} : \boldsymbol{r}_{ijklm} \therefore u_{k,lm} - \boldsymbol{E}_{i,j} : \boldsymbol{\eta}_{ijkmn} \therefore u_{k,mn} + (1/2)u_{i,jk} \therefore \boldsymbol{g}_{ijklmn} \therefore u_{l,mn} + \\ &+ \alpha(\hbar)\left\{\boldsymbol{\varepsilon}_{ij} : \boldsymbol{\delta}_{ij} \cdot \|\psi\|^2 - \boldsymbol{\varepsilon}_{ij} : \boldsymbol{f}_{ijkl} : (\psi_{,l} \otimes \psi_{,k})\right\} + \alpha_1(\hbar)u_{j,k} : \boldsymbol{\delta}_{jk}\psi^*\psi \end{aligned} \tag{3}$$

$$\begin{aligned} U_b = &-(1/2)\boldsymbol{E}_k \cdot \boldsymbol{a}_{kl} \cdot \boldsymbol{E}_k - (1/2)\boldsymbol{V}_{i,j} : \boldsymbol{b}_{ijkl} : \boldsymbol{V}_{kl} + (1/2)\boldsymbol{\varepsilon}_{ij} : \boldsymbol{C}^e_{ijkl} : \boldsymbol{\varepsilon}_{kl} - \\ &- \boldsymbol{\varepsilon}_{ij} : \boldsymbol{e}_{ijkl} : \boldsymbol{V}_{kl} - \boldsymbol{\varepsilon}_{ij} : \boldsymbol{d}_{ijk} \cdot \boldsymbol{E}_k - \boldsymbol{E}_i \cdot \boldsymbol{h}_{ijk} : \boldsymbol{V}_{jk} - \boldsymbol{E}_i : \boldsymbol{f}_{ijkl} \therefore \boldsymbol{w}_{jkl} + \\ &+ \boldsymbol{\varepsilon}_{ij} : \boldsymbol{r}_{ijklm} \therefore \boldsymbol{w}_{klm} - \boldsymbol{V}_{ij} : \boldsymbol{\eta}_{ijkmn} \therefore \boldsymbol{w}_{kmn} + (1/2)\boldsymbol{w}_{ijk} \therefore \boldsymbol{g}_{ijklmn} \therefore \boldsymbol{w}_{lmn} + \\ &+ \alpha_1(\hbar)\left\{\boldsymbol{\varepsilon}_{ij} : \boldsymbol{\delta}_{ij} \cdot \|\psi\|^2 - \boldsymbol{\varepsilon}_{ij} : \boldsymbol{f}_{ijkl} : (\psi_{,l} \otimes \psi_{,k})\right\} + \alpha_1(\hbar)u_{j,k} : \boldsymbol{\delta}_{jk}\psi^*\psi \end{aligned} \tag{4}$$

Donde $\boldsymbol{V}_{ij} = \boldsymbol{E}_{i,j}$; $\boldsymbol{w}_{klm} = u_{k,lm}$; $\boldsymbol{\varepsilon}_{jk} = (1/2)(u_{j,k} + u_{k,j})$. $\boldsymbol{a}_{kl}$, $\boldsymbol{b}_{ijkl}$, $\boldsymbol{C}^e_{ijkl}$, $\boldsymbol{e}_{ijkl}$, $\boldsymbol{d}_{ijk}$, $\boldsymbol{h}_{ijk}$, $\boldsymbol{f}_{ijkl}$, $\boldsymbol{r}_{ijklm}$, $\boldsymbol{\eta}_{ijkmn}$, $\boldsymbol{g}_{ijklmn}$, son los tensores de propiedades materiales. Particularmente, $\boldsymbol{a}_{kl}$, $\boldsymbol{C}^e_{ijkl}$ son los tensores de permitividad de segundo orden y elástico de cuarto orden respectivamente. El tensor $\boldsymbol{g}_{ijklmn}$ representa los efectos elásticos puramente no locales y corresponde a las teorías de elasticidad de tipo Mindlin Aifantis, $\boldsymbol{u}_j$ es el campo de desplazamiento. (Barettin, 2023; Enakoutsa et al., 2016)

2. ECUACIONES CONSTITUTIVAS

Minimizando la energía utilizando un principio de mínima acción tendremos

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma}_{ij} = \frac{\partial U_b}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_{ij}} = \boldsymbol{C}_{ijkl} : \boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{e}_{ijkl} : \boldsymbol{V}_{kl} - \boldsymbol{d}_{ijk} \cdot \boldsymbol{E}_k - \boldsymbol{r}_{ijklm} \therefore \boldsymbol{w}_{klm} + \\ + \alpha_1\|\psi\|^2\{\boldsymbol{\delta}_{ij} - \boldsymbol{f}_{ijkl} : (\psi_{,l} \otimes \psi_{,k})\} \end{aligned} \tag{5}$$

$$\boldsymbol{\tau}_{ijm} = \frac{\partial U_b}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_{ij}} = -\boldsymbol{f}_{ijmk} \cdot \boldsymbol{E}_k + \boldsymbol{r}_{ijmlk} : \boldsymbol{\varepsilon}_{kl} - \boldsymbol{\eta}_{ijmkl} : \boldsymbol{V}_{kl} + \boldsymbol{g}_{ijmknl} \therefore \boldsymbol{w}_{knl} \tag{6}$$

$$\boldsymbol{D}_i = -\frac{\partial U_b}{\partial \boldsymbol{E}_i} = \boldsymbol{a}_{ij} \cdot \boldsymbol{E}_j + \boldsymbol{d}_{jki} : \boldsymbol{\varepsilon}_{jk} + \boldsymbol{h}_{ijk} : \boldsymbol{V}_{jk} + \boldsymbol{f}_{ijkl} \therefore \boldsymbol{w}_{jkl} \tag{7}$$

$$\boldsymbol{Q}_{ij} = -\frac{\partial U_b}{\partial \boldsymbol{V}_{ij}} = \boldsymbol{b}_{ijkl} : \boldsymbol{V}_{kl} + \boldsymbol{e}_{ijkl} : \boldsymbol{\varepsilon}_{kl} + \boldsymbol{h}_{ijk} \cdot \boldsymbol{E}_k + \boldsymbol{\eta}_{ijmkl} \therefore \boldsymbol{w}_{mkl} \tag{8}$$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma}^{MC}_{jk}(\vec{x},t) = \frac{\hbar^2}{2m^*}\{\|\psi_{,j}(\vec{x},t)\|^2\delta_{jk} - \psi_{,j}(\vec{x},t) \otimes \psi^*_{,k}(\vec{x},t) - \psi^*_{,k}(\vec{x},t) \otimes \psi_{,j}(\vec{x},t)\} - \\ - \boldsymbol{f}_{ijkl} : (\psi_{,j}(\vec{x},t) \otimes \psi^*_{,k}(\vec{x},t)) \end{aligned} \tag{9}$$

Las ecuaciones de movimiento serán

$$\begin{aligned}&\rho_t^2 u_i(\vec{x},t) - (\boldsymbol{\sigma}_{ij}(\vec{x},t) - \boldsymbol{\tau}_{ijm,m}(\vec{x},t))_{,j} - \\ &\quad - \alpha_1 \left\{ \{\delta_{ik} - \boldsymbol{f}_{ikjl} : (\psi_{,l} \otimes \psi_{,j})\} \|\psi(\vec{x},t)\|^2 \right\}_{,k} = -\boldsymbol{S}^{Es}_{jklm} \boldsymbol{\varepsilon}^*_{lm,k}(\vec{x},t) \quad \text{en } R_k \end{aligned} \tag{10}$$

$$(\boldsymbol{D}_i - \boldsymbol{Q}_{ij,j})_i = \rho_s \quad \text{en } R_k \tag{11}$$

$$i\hbar \partial_t \psi(\vec{x},t) + (\hbar^2/2m^*)\hat{\nabla}^2 \psi(\vec{x},t) - \alpha_1 (u_{j,j}(\vec{x},t))\psi(\vec{x},t) = 0 \quad \text{en } R_k \tag{12}$$

Las cuales desarrolladas completamente se escribirán:

$$\begin{aligned}&\rho \partial_t^2 u_i(\vec{x},t) - \boldsymbol{C}_{ijkl} u_{k,lj} + \boldsymbol{e}_{ijkl} \boldsymbol{V}_{kl,j} + \boldsymbol{d}_{ijk} \boldsymbol{E}_{k,j} + \boldsymbol{r}_{ijklm} u_{k,lmj} - \boldsymbol{f}_{ijmk} \cdot \boldsymbol{E}_{k,mj} - \\ &\quad - \boldsymbol{\eta}_{ijmkl} : \boldsymbol{E}_{kl,mj} + \boldsymbol{g}_{ijmknl} u_{k,nlmj} - \alpha_1 \left\{ \|\psi\|^2 \{\boldsymbol{\delta}_{ij} - \boldsymbol{f}_{ijkl} : (\psi_{,l} \otimes \psi_{,k})\} \right\}_{,j} = \\ &\qquad = -\left\langle \boldsymbol{S}^{Es}_{ijlm} \boldsymbol{\varepsilon}^*_{lm}(\vec{x},t) \right\rangle_{,j} \text{ en } R_k \quad ; \quad \alpha_1 \in R_0^+ \cong 1 \text{ nm}\end{aligned} \tag{13}$$

$$\begin{aligned}&\boldsymbol{a}_{ij} \boldsymbol{E}_{j,i} + \boldsymbol{d}_{jki} u_{j,ki} + \boldsymbol{h}_{ijk} \boldsymbol{E}_{j,ki} + \boldsymbol{f}_{ijkl} u_{j,kli} - \boldsymbol{b}_{ijkl} \boldsymbol{E}_{k,lji} - \boldsymbol{e}_{ijkl} u_{k,lji} - \\ &\quad - \boldsymbol{h}_{ijk} \boldsymbol{E}_{k,ji} - \boldsymbol{\eta}_{ijmkl} u_{m,klji} = \rho_s \text{ en } R_k \; ; \; \rho_s \in L^2(R_k)\end{aligned} \tag{14}$$

$$i\hbar \partial_t \psi(\vec{x},t) + (\hbar^2/2m^*)\hat{\nabla}^2 \psi(\vec{x},t) - \alpha_1 (u_{j,j}(\vec{x},t))\psi(\vec{x},t) = 0 \text{ en } R_k \tag{15}$$

$\langle \boldsymbol{S}^{Es}_{ijlm} \boldsymbol{\varepsilon}^*_{lm}(\vec{x},t)\rangle_{,j}$ es la expresión que asume la nano-inclusión, el sentido de la promediación es en términos de una función de onda de Schrödinger. (Zhuang et al., 2020; Li, 2015)

A efectos de resolver el problema de las condiciones de borde para el campo eléctrico, consideramos la condición

$$-\boldsymbol{b}_{ijkl} \boldsymbol{E}_{kl,j} + \boldsymbol{e}_{ijkl} u_{k,l} + \boldsymbol{h}_{ijk} \boldsymbol{E}_{k,j} + \boldsymbol{\eta}_{ijmkl} u_{m,klj} = \boldsymbol{D}_i \text{ en } R_k \tag{16}$$

Y la expresamos como un operador pseudo parabólico tal que sus soluciones tiendan a las soluciones estacionarias para t tendiendo a infinito

$$\begin{aligned}&\partial_t \boldsymbol{E}_i(\vec{x},t) - \boldsymbol{b}_{ijkl} \boldsymbol{E}_{kl,j}(\vec{x},t) + \boldsymbol{e}_{ijkl} u_{k,lj}(\vec{x},t) + \boldsymbol{h}_{ijk} \boldsymbol{E}_{k,j}(\vec{x},t) + \\ &\quad + \boldsymbol{\eta}_{ijmkl} u_{m,klj}(\vec{x},t) = \boldsymbol{D}_i \text{ en } R_k\end{aligned} \tag{17}$$

El Sistema queda expresado en la forma:

$$\begin{aligned}&\rho \partial_t^2 u_i(\vec{x},t) - \boldsymbol{C}_{ijkl} u_{k,lj}(\vec{x},t) + \boldsymbol{e}_{ijkl} \boldsymbol{E}_{kl,j}(\vec{x},t) + \boldsymbol{d}_{ijk} \boldsymbol{E}_{k,j}(\vec{x},t) + \boldsymbol{r}_{ijklm} u_{k,lmj}(\vec{x},t) - \\ &\quad - \boldsymbol{f}_{ijmk} \boldsymbol{E}_{k,mj}(\vec{x},t) - \boldsymbol{\eta}_{ijmkl} \boldsymbol{E}_{kl,mj}(\vec{x},t) + \boldsymbol{g}_{ijmknl} u_{k,nlmj} - \\ &\qquad - \alpha_1 \left\{ \|\psi\|^2 \{\boldsymbol{\delta}_{ij} - \boldsymbol{f}_{ijkl}(\psi_{,l} \otimes \psi_{,k})\} \right\}_{,j} = -\left\langle \boldsymbol{S}^{Es}_{ijlm} \boldsymbol{\varepsilon}^*_{lm}(\vec{x},t) \right\rangle_{,j} \text{ en } R_k\end{aligned} \tag{18}$$

$$\begin{aligned}&\partial_t \boldsymbol{E}_i(\vec{x},t) - \boldsymbol{b}_{ijkl} \boldsymbol{E}_{kl,j}(\vec{x},t) + \boldsymbol{e}_{ijkl} u_{k,lj}(\vec{x},t) + \boldsymbol{h}_{ijk} \boldsymbol{E}_{k,j}(\vec{x},t) + \\ &\quad + \boldsymbol{\eta}_{ijmkl} u_{m,klj}(\vec{x},t) = \boldsymbol{D}_i \text{ en } R_k\end{aligned} \tag{19}$$

$$i\hbar \partial_t \psi(\vec{x},t) + (\hbar^2/2m^*)\hat{\nabla}^2 \psi(\vec{x},t) - \alpha_1 (u_{j,j}(\vec{x},t))\psi(\vec{x},t) = 0 \text{ en } R_k \tag{20}$$

Las condiciones iniciales serán

$$u_j(\vec{x},0) = u_j^0 \;/\; u_j^0 \in \boldsymbol{H}_0^1(D_k) \; ; \; \partial_t u_j(\vec{x},0) = w_j^0 \;/\; w_j^0 \in (\boldsymbol{L}^2(D_k))^3 \tag{21}$$

$$\boldsymbol{E}_j(\vec{x},0) = \boldsymbol{E}_j^0 \;/\; \boldsymbol{E}_j^0 \in (\boldsymbol{H}_0^1(D_k))^3 \; ; \; \psi(\vec{x},0) = \psi_0 \;/\; \psi_0 \in H_0^1(D_k) \tag{22}$$

Las condiciones de borde serán de tipo Neumann

$$
\begin{aligned}
&(-\boldsymbol{C}_{ijkl}u_{k,l}(\vec{x},t)+\boldsymbol{e}_{ijkl}\boldsymbol{E}_{kl}(\vec{x},t)+\boldsymbol{d}_{ijk}\boldsymbol{E}_{k}(\vec{x},t)+\boldsymbol{r}_{ijklm}u_{k,lm}(\vec{x},t))\hat{n}_j\Big|_{\partial\Gamma_{in}}-\\
&\quad-\boldsymbol{f}_{ijmk}\cdot\boldsymbol{E}_{k,m}(\vec{x},t)\hat{n}_j\Big|_{\partial\Gamma_{in}}-\boldsymbol{\eta}_{ijmkl}:\boldsymbol{E}_{kl,m}(\vec{x},t)\hat{n}_j\Big|_{\partial\Gamma_{in}}+\boldsymbol{g}_{ijmknl}u_{k,nlm}\hat{n}_j\Big|_{\partial\Gamma_{in}}-\\
&\qquad-\alpha_1\big\{\|\psi\|^2\{\boldsymbol{\delta}_{ij}-\boldsymbol{f}_{ijkl}:(\psi_{,l}\otimes\psi_{,k})\}\big\}\hat{n}_j\Big|_{\partial\Gamma_{in}}=-\langle\boldsymbol{S}^{Es}_{ijlm}\boldsymbol{\varepsilon}^{*}_{lm}(\vec{x},t)\rangle\hat{n}_j\Big|_{\partial\Gamma_{in}} \qquad (23)\\
&(-\boldsymbol{C}_{ijkl}u_{k,l}(\vec{x},t)+\boldsymbol{e}_{ijkl}\boldsymbol{E}_{kl}(\vec{x},t)+\boldsymbol{d}_{ijk}\boldsymbol{E}_{k}(\vec{x},t)+\boldsymbol{r}_{ijklm}u_{k,lm}(\vec{x},t))\hat{n}_j\Big|_{\partial\Gamma_{1}}-\\
&\quad-\boldsymbol{f}_{ijmk}\cdot\boldsymbol{E}_{k,m}(\vec{x},t)\hat{n}_j\Big|_{\partial\Gamma_{1}}-\boldsymbol{\eta}_{ijmkl}:\boldsymbol{E}_{kl,m}(\vec{x},t)\hat{n}_j\Big|_{\partial\Gamma_{1}}+\boldsymbol{g}_{ijmknl}u_{k,nlm}\hat{n}_j\Big|_{\partial\Gamma_{1}}-\\
&\qquad-\alpha_1\big\{\|\psi\|^2\{\boldsymbol{\delta}_{ij}-\boldsymbol{f}_{ijkl}:(\psi_{,l}\otimes\psi_{,k})\}\big\}\hat{n}_j\Big|_{\partial\Gamma_{1}}=-q_j\Big|_{\partial\Gamma_1}\ /\ q_j\in(\boldsymbol{L}^2(\partial\Gamma_1))^2 \qquad (24)\\
&(-\boldsymbol{b}_{ijkl}\boldsymbol{E}_{kl}(\vec{x},t)+\boldsymbol{e}_{ijkl}u_{k,l}(\vec{x},t)+\boldsymbol{h}_{ijk}\boldsymbol{E}_{k}(\vec{x},t)+\boldsymbol{\eta}_{ijmkl}u_{m,kl}(\vec{x},t))\hat{n}_j\Big|_{\partial\Gamma_{in}}=0 \qquad (25)\\
&(-\boldsymbol{b}_{ijkl}\boldsymbol{E}_{kl}(\vec{x},t)+\boldsymbol{e}_{ijkl}u_{k,l}(\vec{x},t)+\boldsymbol{h}_{ijk}\boldsymbol{E}_{k}(\vec{x},t)+\boldsymbol{\eta}_{ijmkl}u_{m,kl}(\vec{x},t))\hat{n}_j\Big|_{\partial\Gamma_{1}}=\bar{q}_j\Big|_{\partial\Gamma_1} \qquad (26)\\
&\bar{q}_j\in(\boldsymbol{L}^2(\partial\Gamma_1))^2\ ;\ \partial M=\partial\Gamma_{in}\cup\partial\Gamma_1
\end{aligned}
$$

Construyendo las funciones de Green y utilizando los teoremas de representación de Green-Lagrange obtenemos las representaciones integrales de las soluciones, para los campos desplazamiento y para el campo eléctrico, la solución de la ecuación de Schrödinger se obtiene utilizando el mismo procedimiento.

$$
\begin{aligned}
u_i(\vec{x},t)=&\int_0^t ds\Big\{\iiint_{V_k}d^3x'\,\boldsymbol{G}_{ik}(\vec{x}-\vec{x}',t-s)\big\{\boldsymbol{f}_{kjmn}\boldsymbol{E}_{n,mj}(\vec{x}',s)+\\
&\quad+\boldsymbol{\eta}_{kjmnl}\boldsymbol{E}_{l,nmj}(\vec{x}',s)-\boldsymbol{e}_{kjnl}\boldsymbol{E}_{ln,j}(\vec{x}',s)+\boldsymbol{d}_{kjn}\boldsymbol{E}_{n,j}(\vec{x}',s)-\\
&\quad-\alpha_1\{\|\psi(\vec{x}',s)\|^2\{\boldsymbol{\delta}_{ij}-\boldsymbol{f}_{ijkl}(\psi_{,l}(\vec{x}',s)\otimes\psi_{,k}(\vec{x}',s))\}\}_{,j}\}\Big\}+\\
&+\iiint_{V_k}d^3x'\{\boldsymbol{G}_{ik}(\vec{x}-\vec{x}',t)\partial_t u_k(\vec{x},0)-\partial_t\boldsymbol{G}_{ik}(\vec{x}-\vec{x}',t)u_k(\vec{x},0)\}+\\
&+\int_0^t ds\Big\{\iint_{\partial\Gamma_{in}}da\,\boldsymbol{G}_{ik}(\vec{x}-\vec{x}',t-s)\langle\boldsymbol{S}^{Es}_{kjlm}\boldsymbol{\varepsilon}^{*}_{lm}(\vec{x},t)\rangle\hat{n}_j\Big|_{\partial\Gamma_{in}}\Big\}+\\
&+\int_0^t ds\Big\{\iint_{\partial\Gamma_{in}}da\,\boldsymbol{G}_{ik}(\vec{x}-\vec{x}',t-s)\bar{q}_j(\vec{x},t,\boldsymbol{E}_j,\psi)\Big|_{\partial\Gamma_{in}}\Big\} \qquad (27)\\
\boldsymbol{E}_i(\vec{x},t)=&\int_0^t ds\Big\{\iiint_{V_k}d^3x'\,\bar{\boldsymbol{G}}_{ik}(\vec{x}-\vec{x}',t-s)\{\boldsymbol{D}_k(\vec{x}',s)-\boldsymbol{e}_{ijkl}u_{k,lj}(\vec{x}',s)-\\
&\quad-\boldsymbol{\eta}_{ijmkl}u_{m,klj}(\vec{x}',s)\}\Big\}+\iiint_{V_k}d^3x'\big\{\bar{\boldsymbol{G}}_{ij}(\vec{x}-\vec{x}',t)\boldsymbol{E}_j(\vec{x}',0)\big\}+\\
&+\int_0^t ds\Big\{\iint_{\partial\Gamma_{in}}da\,\bar{\boldsymbol{G}}_{ik}(\vec{x}-\vec{x}',t-s)q_{1j}(\vec{x},t,u_j)\Big|_{\partial\Gamma_{in}}\Big\} \qquad (28)\\
\psi(\vec{x},t)=&\,\alpha_1\int_0^t ds\Big\{\iiint_{V_k}d^3x'\,g(\vec{x}-\vec{x}',t-s)\{(u_{j,j}(\vec{x}',s))\psi(\vec{x}',s)\}\Big\}+\\
&+\iiint_{V_k}d^3x'\,\{g(\vec{x}-\vec{x}',t)\psi(\vec{x}',0)\} \qquad (29)
\end{aligned}
$$

Se deben agregar a este conjunto solución, las condiciones de resolubilidad asociadas a todo problema de Neumann, dada que adolece de unicidad. Las funciones de Green son:

$$\rho\partial_t^2 \boldsymbol{G}_{ik}(\Delta\vec{x},\Delta t) - \boldsymbol{C}_{ilmn}\boldsymbol{G}_{kn,ml}(\Delta\vec{x},\Delta t) + \boldsymbol{r}_{ijslm}\boldsymbol{G}_{ks,lmj}(\Delta\vec{x},\Delta t) + \\ + \boldsymbol{g}_{ijmsnl}\boldsymbol{G}_{ks,nlmj}(\Delta\vec{x},\Delta t) = \boldsymbol{\delta}_{ik}(\delta(\Delta\vec{x},\Delta t) - 1/V) \quad (30)$$

$$-\partial_t \bar{\boldsymbol{G}}_{ik}(\Delta\vec{x},\Delta t) - \boldsymbol{b}_{ijnl}\bar{\boldsymbol{G}}_{kn,lj}(\Delta\vec{x},\Delta t) + \boldsymbol{h}_{ijn}\bar{\boldsymbol{G}}_{kn,j}(\Delta\vec{x},\Delta t) = \\ = \boldsymbol{\delta}_{ik}(\delta(\Delta\vec{x},\Delta t) - 1/V) \quad (31)$$

$$i\hbar\partial_t g(\Delta\vec{x},\Delta t) - (\hbar^2/2m^*)\hat{\nabla}^2 g(\Delta\vec{x},\Delta t) = \delta(\Delta\vec{x},\Delta t) \quad (32)$$

Junto con el conjunto de condiciones iniciales y de borde, homogéneas

3. TENSORES DE ESHELBY CON CORRECCIONES FLEXO-ELÉCTRICAS

$$\boldsymbol{K}_{jk} = U_b\boldsymbol{\delta}_{jk} - \boldsymbol{\sigma}_{jl} : \boldsymbol{\varepsilon}_{lk} = U_b\boldsymbol{\delta}_{jk} - \boldsymbol{C}_{ilps} : u_{p,s}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_{lk} + \boldsymbol{e}_{ilks} : \boldsymbol{E}_{k,s}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_{lk} + \\ + \boldsymbol{d}_{ils}\cdot\boldsymbol{E}_s\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_{lk} + \boldsymbol{r}_{ilpsm} \therefore u_{psm}\boldsymbol{\varepsilon}_{lk} - \alpha_1\|\psi\|^2\{\boldsymbol{\delta}_{jl} - \boldsymbol{f}_{lps} : (\psi_{,s}\otimes\psi_{,p})\}\boldsymbol{\varepsilon}_{lk} \quad (33)$$

$$\boldsymbol{K}_{AB} = U_b\boldsymbol{\delta}_{AB} - \boldsymbol{F}_{Aj}\boldsymbol{P}_{jB} = U_b\boldsymbol{\delta}_{AB} - \boldsymbol{J}\boldsymbol{F}_{Aj}\cdot\big\{\boldsymbol{C}_{ilps} : u_{p,s} + \boldsymbol{e}_{ilks} : \boldsymbol{E}_{k,s} + \\ + \boldsymbol{d}_{ils}\cdot\boldsymbol{E}_s + \boldsymbol{r}_{ilpsm} \therefore u_{psm} - \alpha_1\|\psi\|^2\{\boldsymbol{\delta}_{jl} - \boldsymbol{f}_{lps} : (\psi_{,s}\otimes\psi_{,p})\}\big\}\cdot\boldsymbol{F}_{lB}^{-T} \quad (34)$$

En las configuraciones deformada y no deformada respectivamente, a partir de estas consideraciones es posible construir el problema de Eshelby con correcciones flexo-eléctricas y mecano-cuánticas, pudiéndose inferir entonces el mecanismo de formación del proceso de confinamiento. (Tagantsev, 1986, 1991; Wang et al., 2019)

El siguiente grafico muestra el arreglo experimental pensado para analizar el efecto piezo-flexo-eléctrico con nano-inclusiones, que se describe en el trabajo

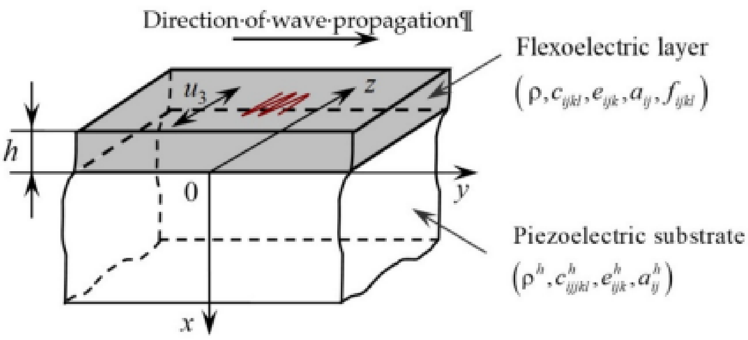


Figura 3: Estructura piezoeléctrica en capas (Hrytsyna et al., 2021)

4. CUESTIONES DE ABORDAJE COMPUTACIONAL

Las fuentes, asociadas a densidades de polarización continuas y discretas, se asumen constituidas de la siguiente forma:

a) **Fuentes puntuales. Representación de defectos puntuales**

$$\boldsymbol{f}_j(\vec{x},t) = \|f\|\cdot\hat{\boldsymbol{e}}_j\cdot\delta(\vec{x}-\vec{x}_0)\cdot\mathcal{G}(t-t_0) \text{ en } R_k \quad ; \quad f_j \in (\boldsymbol{L}^2(R_k^+))^3 \quad (35)$$

$$\int_0^\infty dt\left\{f_j(t)\cdot\mathcal{G}(t-t_0)\left\{\iiint_{-\infty}^{\infty} d^3x\,\delta(\vec{x}-\vec{x}_0)\right\}\right\} = 1 \quad ; \quad \mathcal{G}\in L^2(R_k^+) \quad (36)$$

Donde f_j es la magnitud de la fuerza aplicada, $\mathcal{G}$ es una función arbitraria que mide la amplitud temporal de la fuerza, $\hat{\boldsymbol{e}}_j$ dirección de aplicación de la fuerza

b) **Fuentes tensoriales extendidas. Representación de inclusiones**

$$\boldsymbol{f}_j(\vec{x},t) = -(\mathscr{M}_{jk}(\vec{x},t))_{,k} / \mathscr{M}_{jk}(\vec{x},t) = \boldsymbol{m}_{jk}(t)\delta(\vec{x}-\vec{x}_0) \tag{37}$$
$$\boldsymbol{m}_{jk}(t) = \boldsymbol{m}^0_{jk}\mathcal{G}(t-t_0) \tag{38}$$
$$\boldsymbol{m}^0_{jk} \in V^{3\times 3} \;;\; \boldsymbol{m}^0_{jk} = \boldsymbol{m}^0_{kj} \;;\; \boldsymbol{m}^0_{kj} q_k q_j > 0$$

Los sistemas de ecuaciones integrales representativos de las soluciones semi-analíticas (27), (28) y (29) para cada modelo analizado, podrían resolverse utilizando wavelets de la siguiente forma.

Base de Haar y formula de cuadratura asociada

$$\{t \to \psi_{n,k}(t) = \psi(2^n t - k)\,;\; n \in \mathbb{N}, 0 \leq k < 2^n\}$$
$$\int_{-\infty}^{\infty} dt\, 2^m \psi(2^m t - n)\psi(2^{m_1} t - n_1) = \delta_{m,m_1}\delta_{n,n_1}$$
$$S_N(f) = \frac{(b-a)(d-c)(h-e)}{8N^3} \sum_{k=1}^{2N}\sum_{j=1}^{2N}\sum_{i=1}^{2N} f\{a + (\delta_x/2)(2i-1), c + (\delta_y/2)(2j+1), e + (\delta_z/2)(2k+1)\}$$

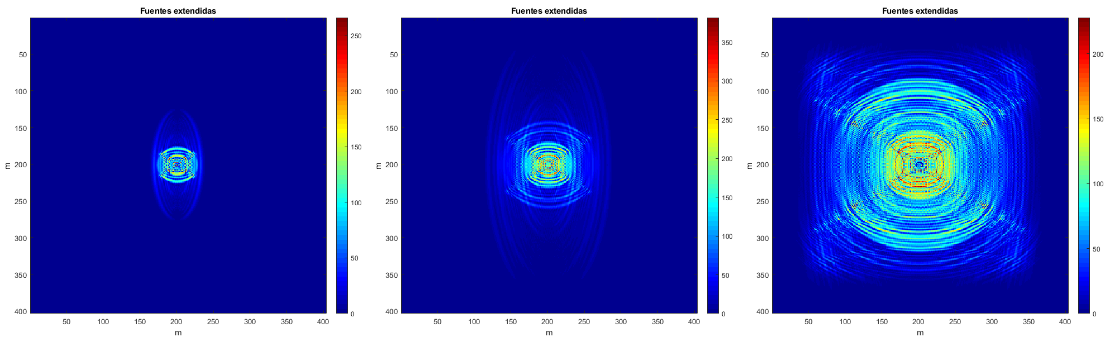
Finalmente puede probarse que el error cometido tiene la estructura siguiente

$$d\{\|u^*_j - u^{(m)}_j\|\} \leq \frac{\sigma^{m+1}}{1-\sigma} M_0 \quad ; \quad M_0 = \sup_{\vec{x},t\in R_k}\{\|\boldsymbol{F}(\vec{x},t,u^*_j)\|\}$$

Las representaciones integrales se expresarían en la forma siguiente

$$\begin{aligned}
\bar{u}^{(m)}_j(\vec{x},t) &= \hat{\bar{u}}^0_j(\vec{x},t) + \\
&+ \delta_x\delta_y\delta_z \sum_{k=1}^{2N}\sum_{j=1}^{2N}\sum_{i=1}^{2N} \Big\{ \int_0^t dt' H_{jk}\{x,y,z,t-t', a + (\delta_x/2)(2i-1), c + (\delta_y/2)(2j+1), \\
&\qquad e + (\delta_z/2)(2k+1)\}\, \psi_k\, \{u^{(m+1)}_j\{a + (\delta_x/2)(2i-1), c + (\delta_y/2)(2j+1), \\
&\qquad\qquad e + (\delta_z/2)(2k+1)\}\} \Big\} + \\
&+ \delta_x\delta_y\delta_z \sum_{k=1}^{2N}\sum_{j=1}^{2N}\sum_{i=1}^{2N} \Big\{ \int_0^t dt' \bar{H}_{jk}\{x,y,0,t-t', a + (\delta_x/2)(2i-1), c + (\delta_y/2)(2j+1), \\
&\qquad e + (\delta_z/2)(2k+1)\}\, \bar{\psi}_k\, \{u^{(m+1)}_j\{a + (\delta_x/2)(2i-1), c + (\delta_y/2)(2j+1), \\
&\qquad\qquad e + (\delta_z/2)(2k+1)\}\} \Big\}
\end{aligned}$$

Los gráficos siguientes muestran las distribuciones de tensiones flexo-eléctricas bidimensionales $\sigma^f_x(x,z,t)$, $\sigma^f_z(x,z,t)$, como se ve en la Figura 3.

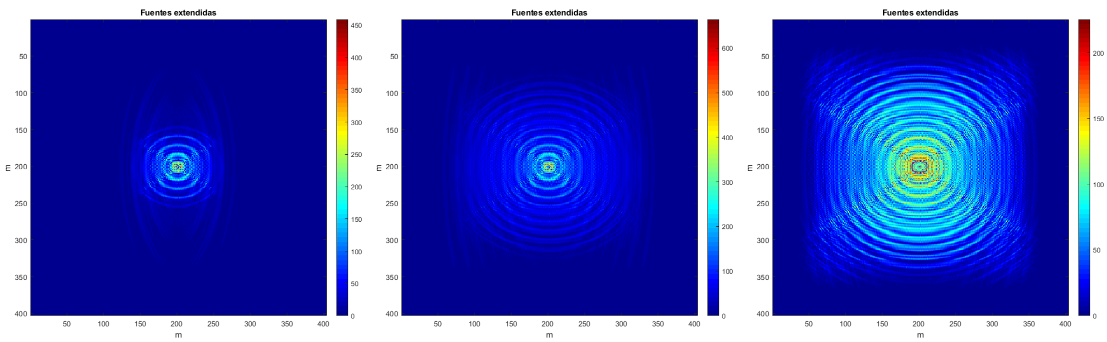


(a) (b) (c)

Figura 4: Fuente extendida

Código 1: Fuente extendida

```
% fuente
factor = 1e10;
a = pi*pi*f0*f0;
kx = 1;
kz = 1;
[T, ~] = meshgrid(t, 1:size(X, 1));
source_term = factor * sec(kx*X.^2 + kz*Z.^2) * sin(-a*(T-t0));
```



(a) (b) (c)

Figura 5: Segunda fuente extendida

Código 2: Segunda fuente extendida

```
% fuente
factor = 1e10;
a = pi*pi*f0*f0;
kx = 1;
kz = 1;
[T, ~] = meshgrid(t, 1:size(X, 1));
source_term = factor * (cos(kx*X.^2 + kz*Z.^2))^2 * sin(-a*(T-t0));
```

5. CONCLUSIONES

En el presente trabajo, se desarrolló un modelo de efecto piezo-flexo-eléctrico con nano-inclusiones, se plantearon las ecuaciones constitutivas y las ecuaciones de movimiento respectivas, posteriormente se escribieron las representaciones integrales de las soluciones, finalmente se bosquejo a manera de propuesta, un mecanismo de confinamiento asociado al análogo del experimento de Eshelby clásico, ahora acoplado a un campo de tipo Schrödinger, en términos de sendos tensores escritos en la configuración deformada y no deformada respectivamente.

REFERENCIAS

Barettin D. State of the art of continuous and atomistic modeling of electromechanical properties of semiconductor quantum dots. *Nanomaterials*, 13(12), 2023. ISSN 2079-4991. doi:10.3390/nano13121820.

Enakoutsa K., Corte A.D., y Giorgio I. A model for elastic flexoelectric materials including strain gradient effects. *Mathematics and Mechanics of Solids*, 21(2):242–254, 2016. doi: 10.1177/1081286515588638.

Hrytsyna O., Sladek J., y Sladek V. The effect of micro-inertia and flexoelectricity on love wave propagation in layered piezoelectric structures. *Nanomaterials*, 11(9), 2021. ISSN 2079-4991. doi:10.3390/nano11092270.

Hu S. y Shen S. Electric Field Gradient Theory with Surface Effect for Nano-Dielectrics. *Computers, Materials & Continua*, 13(1):63–88, 2009. ISSN 1546-2226. doi:10.3970/cmc.2009.013.063.

Huang S., Qi L., Huang W., Shu L., Zhou S., y Jiang X. Flexoelectricity in dielectrics: Materials, structures and characterizations. *Journal of Advanced Dielectrics*, 08(02):1830002, 2018. doi:10.1142/S2010135X18300025.

Li X. *The Coupling between Quantum Mechanics and Elasticity*. Tesis de Doctorado, Department of Mehcanical Engineering, University of Houston, 2015.

Stengel M. y Vanderbilt D. Quantum theory of mechanical deformations. *Phys. Rev. B*, 98:125133, 2018. doi:10.1103/PhysRevB.98.125133.

Tagantsev A.K. Piezoelectricity and flexoelectricity in crystalline dielectrics. *Phys. Rev. B*, 34:5883–5889, 1986. doi:10.1103/PhysRevB.34.5883.

Tagantsev A.K. Electric polarization in crystals and its response to thermal and elastic perturbations. *Phase Transitions*, 35(3-4):119–203, 1991. doi:10.1080/01411599108213201.

Wang B., Gu Y., Zhang S., y Chen L.Q. Flexoelectricity in solids: Progress, challenges, and perspectives. *Progress in Materials Science*, 106:100570, 2019. ISSN 0079-6425. doi: https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2019.05.003.

Zhu J., Hu P., Chen Y., Chen S., Zhang C., Wang Y., y Liu D. Waves Propagating in Nano-Layered Phononic Crystals with Flexoelectricity, Microstructure, and Micro-Inertia Effects. *Nanomaterials*, 12(7), 2022. ISSN 2079-4991. doi:10.3390/nano12071080.

Zhuang X., Nguyen B.H., Nanthakumar S.S., Tran T.Q., Alajlan N., y Rabczuk T. Computational modeling of flexoelectricity—a review. *Energies*, 13(6), 2020. ISSN 1996-1073. doi:10.3390/en13061326.